重力場での拡散方程式の解とその特性 : III. 一定境界密度による分布

AUTHOR(S):

餌取, 寛次

物性研究 40－6（1983－9）

重力場での拡散方程式の解とその特性
Ⅲ．一定境界密度による分布

宮崎大・工・応物　餌　取　寛　次

（1983年8月1日　受理）

摘　要

Brown 運動をする粒子の拡散粒子数密度に関する分布が，重力場による非定常粒子速度を考慮して求められる。この分布は，従来の重力場のない場合での分布からの〝ずれ〟を与え，この〝ずれ〟は重力加速度と場の粘性抵抗に関係して示される。

§1　序

Brown 運動をする粒子の拡散に対する重力場の影響は，Smoluchowski の式に基づく解析が Chandrasekhar によって検討されているが，それは重力場の方向に対する一定速度を有する粒子の拡散解に限定されている。[1)]

この Brown 粒子が，重力場の方向に非定常速度を有する場合の拡散方程式は，Langevin 方程式と粒子流に対する連続の式を考慮して与えられている。[2)] この拡散方程式について，インパルス応答及び周期密度源による分布を示す解の特性が得られがいる。[3)]

今回は，一定境界密度源に対する分布としての解を Laplace 変換[4, 5)]を用いて求めたものである。この解は，従来から示されている固体中での原子濃度やイオン濃度拡散の分布[6～8)]に対しても，重力場の影響による〝ずれ〟を示すものと考えられる。[9)]

§2　重力場での拡散方程式

重力場で質量 m の Brown 粒子の任意時刻 t における Langevin 方程式，重力方向での任意位置 z での Fick の法則に基づく粒子流密度 $\boldsymbol{J}(z, t)$ 及び粒子数密度 $\rho(z, t)$ に対する連続の式は，それぞれ次のように与えられる

---

*) ETORI, Kanji

$$m\frac{\mathrm{d}\,v(t)}{\mathrm{d}\,t}=-\gamma\,v(t)-mg+R(t) \qquad g:\text{重力加速度} \quad (2.1)$$

$v(t)$：粒子速度

γ：抵抗係数

$$\boldsymbol{J}(z,t)=-D\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial z}+\rho(z,t)<v(t)>, \qquad D:\text{拡散係数} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial t}+\mathrm{div}\cdot\boldsymbol{J}(z,t)=0 \quad (2.3)$$

ただし $R(t)$ は熱運動によって生じる周囲媒体分子が粒子に及ぼすランダムな力を示し，$<v(t)>$ は (2.1) 式によって得られる $v(t)$ の集団平均を示すものであって，$<R(t)>=0$ の条件を含むものである。

以上の (2.1) ～ (2.3) 式から，γ，g 及び D を一定とすると，次のように重力場での拡散方程式が得られる[3]。

$$\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial t}=-<v(t)>\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial z}+D\frac{\partial^2\rho(z,t)}{\partial z^2} \qquad z,t>0 \quad (2.4)$$

§ 3　一定境界密度源に対する解

(2.4) 式を解くために与えられる初期及び境界条件は，ρ_0 を一定粒子数密度として

$$\rho(z,0)=0,\quad z>0 \quad (3.1)$$

$$\rho(0,t)=\rho_0\,u(t). \qquad u(t)=\begin{cases}1 & t>0\\ 0 & t<0\end{cases} \quad (3.2)$$

収束条件及び (3.1) と (3.2) 式を考慮することによって得られる (2.4) 式の解は，Laplace 変換を用いることによって次のように示される（附録参照）

$$\frac{\rho(z,t)}{\rho_0}=\frac{1}{2}\left\{\mathrm{erfc}\left(\frac{mg}{2\gamma}\sqrt{\frac{t}{D}}+\frac{z-F(t)}{2\sqrt{Dt}}\right)+\mathrm{erfc}\left(-\frac{mg}{2\gamma}\sqrt{\frac{t}{D}}+\frac{z-F(t)}{2\sqrt{Dt}}\right)\cdot\exp\left[-\frac{mgz}{\gamma D}\left(1-\frac{1}{z}F(t)\right)\right]\right\}$$

$$z,\ t>0, \quad (3.3)$$

ただし

$$\mathrm{erfc}(x)=1-\mathrm{erf}(x),\quad \mathrm{erf}(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x \exp(-y^2)\,\mathrm{d}y,$$

$$F(t)=\int_0^t [<v(t')>-<v(\infty)>]\,\mathrm{d}t' .$$

(3.3) 式の近似を考えると，$v(0)=0$ として

$$\frac{\rho(z,t)}{\rho_0}=\frac{1}{2}\left\{\mathrm{erfc}\left(\frac{mg}{2\gamma}\sqrt{\frac{t}{D}}+\frac{z-(\frac{m}{\gamma})gt}{2\sqrt{Dt}}\right)\right.$$

$$\left.+\,\mathrm{erfc}\left(-\frac{mg}{2\gamma}\sqrt{\frac{t}{D}}+\frac{z-(\frac{m}{\gamma})gt}{2\sqrt{Dt}}\right)\exp\left[-\frac{mgz}{\gamma D}\left(1-\frac{1}{z}\left(\frac{m}{\gamma}\right)gt\right)\right]\right\}$$

$$,\quad \frac{\gamma}{m}t \ll 1, \tag{3.4}$$

$$=0,\quad t\to 0 \quad ;\ \rho(z,0)=0,\quad z>0 . \tag{3.5}$$

さらに境界条件 (3.2) に対しては，

$$\frac{\rho(0,t)}{\rho_0}=1,\qquad F(t)=0\ (<v(t)>=<v(\infty)>=0,\quad z=0) \tag{3.6}$$

によって成り立つ。

さらにまた抵抗係数が大きい場合か或は長時刻に対する近似では，(3.3) 式は次のようになる

$$\frac{\rho(z,t)}{\rho_0}\begin{cases}=\dfrac{1}{2}\left\{\mathrm{erfc}\left(\dfrac{mg}{2\gamma}\sqrt{\dfrac{t}{D}}+\dfrac{z}{2\sqrt{Dt}}\right)+\mathrm{erfc}\left(-\dfrac{mg}{2\gamma}\sqrt{\dfrac{t}{D}}+\dfrac{z}{2\sqrt{Dt}}\right)\cdot\exp\left(-\dfrac{mgz}{\gamma D}\right)\right\}, & \\ \qquad g\fallingdotseq 0,\quad <v(t)>\to<v(\infty)>,\quad \dfrac{\gamma}{m}t\gg 1 & (3.7)\\ =\mathrm{erfc}\left(\dfrac{z}{2\sqrt{Dt}}\right),\quad g=0 & (3.8)\\ =\exp\left(-\dfrac{mgz}{\gamma D}\right),\quad g\fallingdotseq 0,\quad t\to\infty & \\ =\exp\left(-\dfrac{mgz}{k_B T}\right),\quad D=\dfrac{k_B T}{\gamma}:\ \text{Einstein の関係式} & (3.9)\end{cases}$$

k_B : Boltzmann 定数，T : 絶対温度

上記(3.7)式は Chandrasekhar によって示された解[1]と本質的に同じものであり，(3.8)式は計測的な応用を考えた立場での固体内原子濃度分布を示す従来の解[6~8]を示している。また(3.9)式は，定常分布として，理想気体モデルでの粒子密度に対するカノニカル分布と一致するものである。[2,10] 重力場での粒子拡散についての計測的問題に対して，(3.3)式がいかなる役割を果たすかの検討は今後に残したい。

附　録

(2.4)式に対して次の置換を考えてみる

$$\left.\begin{aligned} \rho(z,\tau) &= \chi(\xi,\tau)\cdot\exp\left[\frac{\langle v(\infty)\rangle}{2D}\cdot\xi-\frac{(\langle v(\infty)\rangle)^2}{4D}\cdot\tau\right] \\ \xi &= z-\int_0^\tau[\langle v(t)\rangle-\langle v(\infty)\rangle]\,dt \end{aligned}\right\} \quad (\mathrm{A.}\ 1)$$

(A. 1)式を(2.4)式に代入すると，次の式が得られる

$$\frac{\partial\chi(\xi,\tau)}{\partial\tau}=D\frac{\partial^2\chi(\xi,\tau)}{\partial\xi^2},\quad \xi,\ \tau>0\quad . \qquad (\mathrm{A.}\ 2)$$

境界条件(3.2)は，$\xi\to0$ ($z\to0,\ t>0$) とすることによって与えられるものとする。(A. 2)式に対して変換理論[4,5]を適用することによって，$\chi(\xi,\tau)$ の Laplace 変換 $\hat{\chi}(\xi,s)$ が得られる

$$\hat{\chi}(\xi,s)=-\frac{\rho_0}{2\lambda_0}\left(\frac{1}{\sqrt{s}+\lambda_0}-\frac{1}{\sqrt{s}-\lambda_0}\right)\cdot\exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}}\xi\right). \qquad (\mathrm{A.}\ 3)$$

ただし

$$\hat{\chi}(\xi,s)=\int_0^\infty\chi(\xi,\tau)\cdot\exp(-s\tau)\,d\tau,\quad s：\text{複素変数},$$

$$\lambda_0=\frac{\langle v(\infty)\rangle}{2\sqrt{D}}\ .$$

(A.3)式の逆変換から

$$\chi(\xi,\tau)=\frac{1}{2}\rho_0\cdot\exp(\lambda_0^2\cdot\tau)\left\{\mathrm{erfc}\left(\lambda_0\sqrt{\tau}+\frac{k}{2\sqrt{\tau}}\right)\cdot\exp(\lambda_0 k)+\mathrm{erfc}\left(-\lambda_0\sqrt{\tau}+\frac{k}{2\sqrt{\tau}}\right)\cdot\exp(-\lambda_0 k)\right\}$$

$$,\ k=\frac{\xi}{\sqrt{D}}\ . \qquad (\mathrm{A.}\ 4)$$

(A. 1) 式の関係を考慮すると，(A.4) 式から (3.3) 式が得られる。

参 考 文 献

1) S. Chandrasekhar: Rev. Mod. Phys. **15** (1943) 1.
2) G. G. Emch: J. Math. Phys. **14** (1973) 1775.
3) 餌取：物性研究 **36** (1981) 209, 295, 347.
4) M. Abramowitz and I. A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions.* (Dover Pub., New York, 1965) pp. 1020–1030.
5) C. T. Tranter: *Integral Transforms in Mathematical Physics.* (Chapman and Hall Ltd., London, 1971) Chap. II, pp. 18–31.
6) R. C. Miller and F. M. Smith: Phys. Rev. **107** (1957) 65.
7) R. A. Auerbach and G. W. Robinson: J. Chem. Phys. **72** (1980) 3528.
8) J. T. Lue and U. Meyer: J. Appl. Phys. **54** (1983) 1148.
9) K. Etori: to be published.
10) J. T. Houghton: *The physics of atmospheres.* (Cambridge Univ. Press, London, 1977) pp. 1–3.